



TITLE:

B9 2次元soft-core modelの計算機実験(配位相転移の研究,基研研究会報告)

AUTHOR(S):

船越, 満明; 上田, 顕

CITATION:

船越, 満明 ...[et al]. B9 2次元soft-core modelの計算機実験(配位相転移の研究,基研研究会報告). 物性研究 1976, 26(2): B85-B96

ISSUE DATE:

1976-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89154>

RIGHT:

で、所謂 neutral pseudo-atom の概念が、気・液界面のときよりも無理なく適用できよう。得られる結果は界面層の厚さをどのようにとるか、さらに界面層でその密度ならびにイオン配位がどのように変化するかに依存する。この間の事情は、気・液界面の表面張力に対する議論と共通点がある。定量的な議論を進めるためには界面構造に関するもっと的確な知識が必要である。

参 考 文 献

- 1) D. R. H. Jones, J. Materials Science, 9 (1974) 1.
- 2) A. S. Skapski, Acta Met. 4 (1956) 576.
- 3) K. A. Jackson and B. Chalmers, Can. J. Phys. 34 (1956) 473.
- 4) K. A. Jackson, Liquid Metals and Solidification (Am. Soc. Metals, 1958) p.174.
- 5) R. H. Ewing, J. Crystal Growth, 11 (1971) 221; Phil. Mag., 25 (1972) 779.
- 6) R. Evans, J. Phys. C: Solid State Phys., 7 (1974) 2808.

B 9

2次元 soft-core model の計算機実験

京大工 船 越 満 明
上 田 顕

高密度液相での分子の協力運動を調べるために行った計算機実験の結果を報告する。2次元系を採るのは、分子運動を視覚的に把握しやすいからであって、2次元系の特徴がそのまま3次元系にあてはまらなくても、ある示唆は得られるであろう。

転移は $\rho^* = 0.94 \sim 0.95$ で起るので、その近傍をねらい、粒子数 $N=90, 810$ で実験を行った(表1)。各密度状態での分子運動をみるため、粒子の100ステップ(A_r では約 10^{-12} 秒)にわたる平均位置を100ステップ毎に折れ線でつないだものを図1, 2に示す。こうして粒子の短周期の振動モードを除去し、比較的長周期の運動モードを見易くしている。特徴的協力運動として次のものがみられる。

表 1

分 類	ρ	N	kT/ϵ	ρ^*	PA/NkT
a	0.8	90	0.4517	0.9133	11.45
b	0.825	810	0.5070	0.9239	11.82
c	0.825	90	0.4430	0.9449	12.69
d	0.83	90	0.4573	0.9456	12.34

$$\rho = N \sigma^2 / A, \quad \rho^2 = \rho (\epsilon / kT)^{\frac{1}{6}}, \quad A: \text{系の面積}$$

- (1) 線状に並んで同一方向へつらなって移動する鎖状拡散（図の破線で囲んだ部分）
- (2) 鎖状拡散の集団
- (3) 渦状運動（図の点線で囲んだ部分），ただし，この渦は図 2a と 2b を比較すればわかるように，各粒子が一巡するほど長時間その形状を保持しているものではない。
- (4) 固相秩序をもつ領域

これらの協力運動について渦運動の観点からその相関度，渦の平均サイズ，強さなどを調べる。このために，いくつかの中心点まわりの各粒子の角速度成分 v_θ^* を求め，他方各中心点のまわりを等面積の円環に分割し，各円環毎に次の分布を求める。

$f_j(v_\theta^*) \dots\dots\dots j$ 番目の円環に属する粒子の v_θ^* の分布

$F_j(\bar{v}_\theta^*) \dots\dots\dots j$ 番目の円環に属する粒子の v_θ^* の平均をさらにある時間間隔（さし当り 100 ステップとした）について平均した値 \bar{v}_θ^* の分布。

両分布とも理論的には平均値 0 であるが，サンプルの結果は十分 0 に近い。標準偏差は図 3，4 に示す。 $\sigma_{f_j}^*$ に j によらないが， $\sigma_{F_j}^*$ は j と共に減少する。また低密度ほど鎖状拡散が活潑になるため，いずれの偏差も ρ^* が小さいほど大きい。 j で平均した標準偏差と ρ^* の関係は図 5，6 に示す。状態 d は固相と液相とにデータを分けて求めたものであるが，両相の相異は F_j 分布に現われる。

F_j 分布には円環中の粒子の空間的・時間的相関が含まれている。これと，全く相関

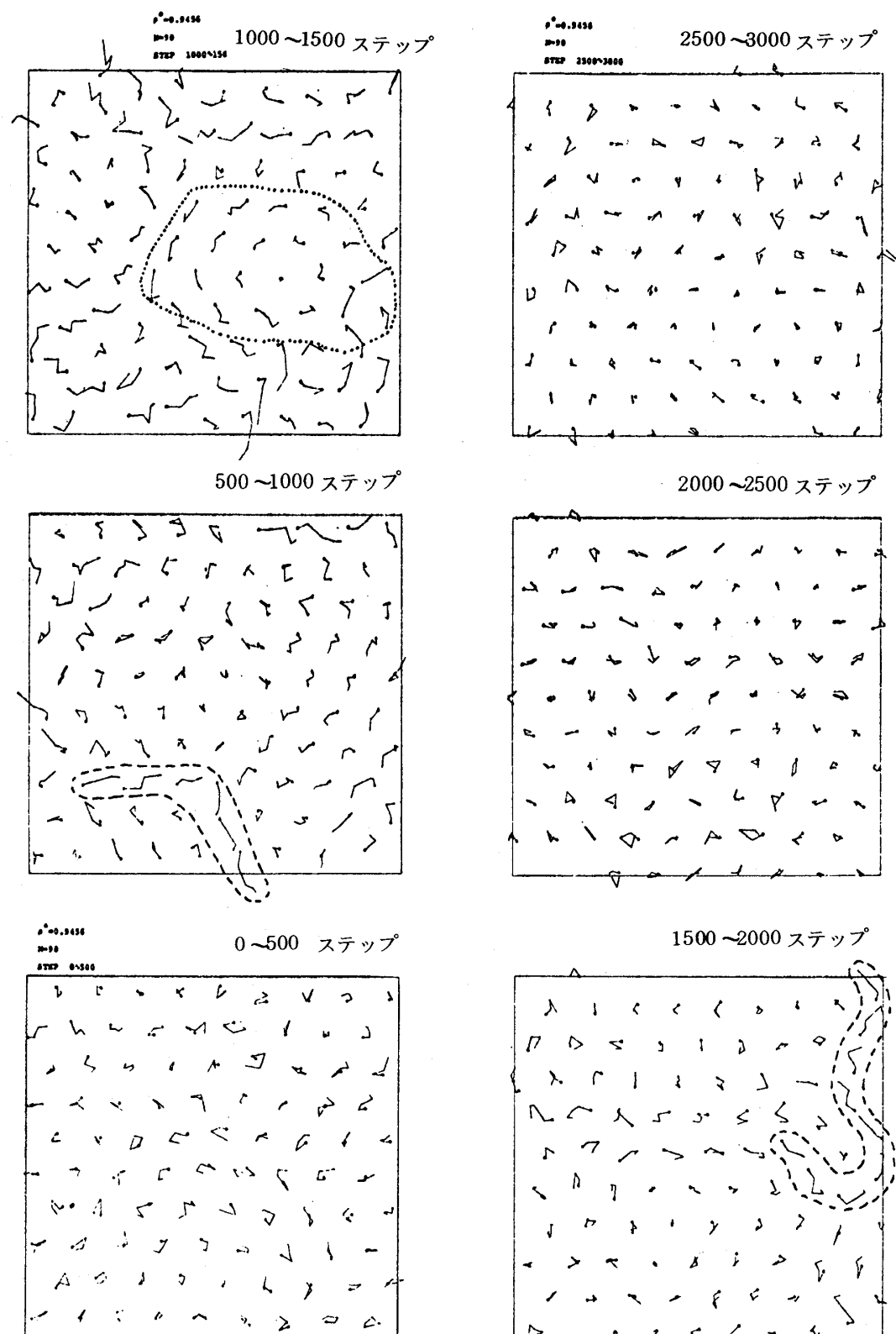


図1 分子のトラジェクトリー $\rho^* = 0.9456$, $N = 90$

がないとしたときの分布 $\tilde{F}_j(v_\theta)$ とをくらべて、円環状相関度 $\xi_j \equiv \sigma_{F_j} / \sigma_{\tilde{F}_j}$ を図7に、 j で平均したのを図8に示す。ただし、 $\tilde{F}_j(v_\theta)$ は σ_{f_j} と中心極限定理を用いて、標準偏差 $\sigma_{\tilde{F}_j} = \sigma_{f_j} / \sqrt{m_j}$ の正規分布で与えられるとした。ここに m_j は $F_j(\bar{v}_\theta)$ で平均値 \bar{v}_θ を求める際の v_θ のサンプル数である。アルゴリズムは省略するが、渦の平均サイズ $\langle r^* \rangle$ は図9に示す。 $\langle \xi_j \rangle, \langle r^* \rangle$ とともに固相で小さいのは当然であるが、予想よりは大きい。これは F_j 分布で \bar{v}_θ を求める際の時間間隔 (100 ステップ)

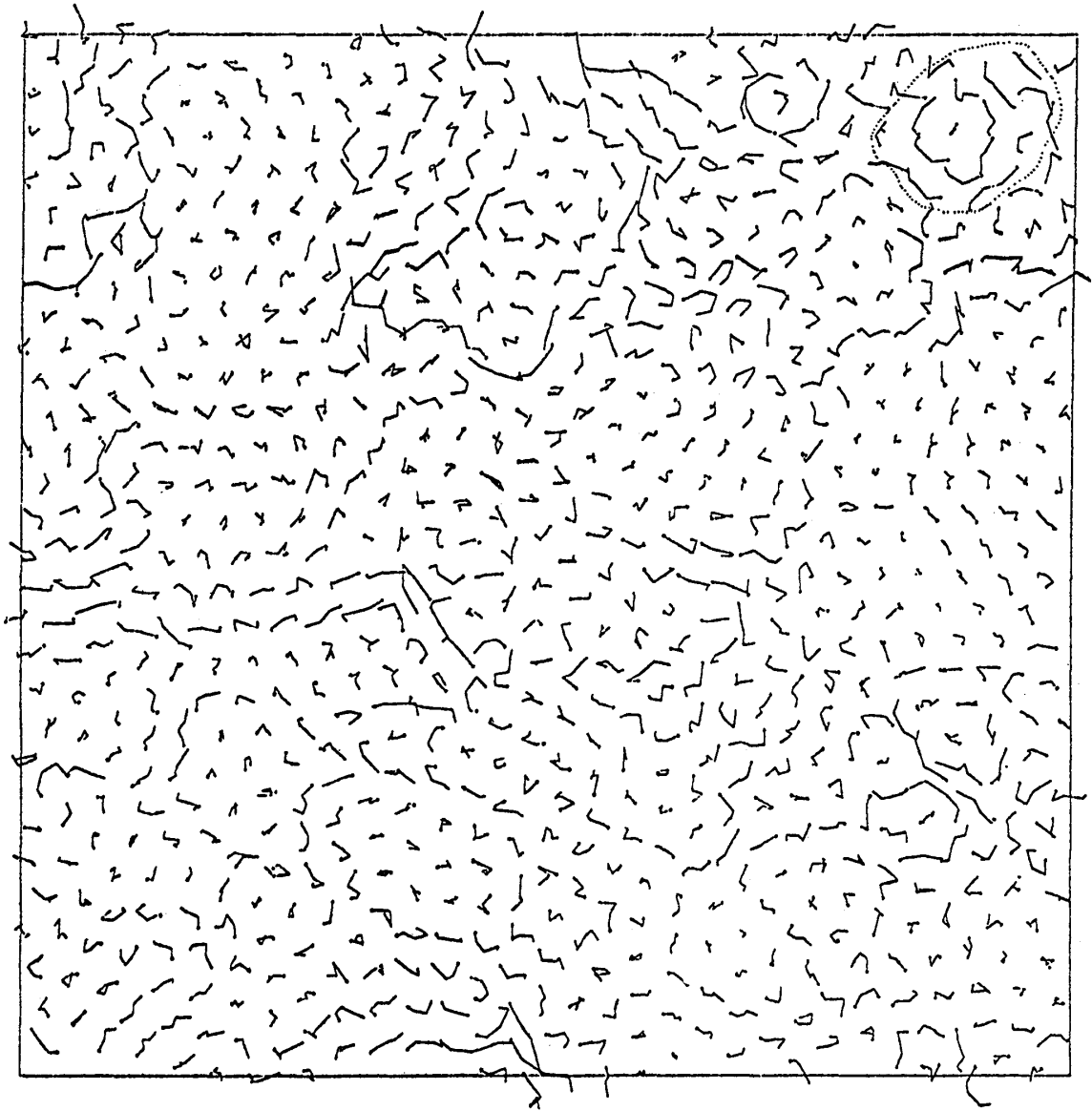


図 2a $\rho^* = 0.9239$, $N = 810$

STEP 2000 ~ 2500

が短いことによっている。300ステップにしたときの $\langle r^* \rangle$ は半分以下に減ることが図9よりわかる。高密度液相での平均サイズ ~ 0.7 は $g(r)$ の第1ピークの位置 ~ 1.0 にくらべて小さすぎる。これは渦の規準が強すぎたこと、 F_j 分布には渦無しも統計集団のサンプルとして入っていることにする。渦無しを除いたサンプルでの平均サイズは ~ 2.0 程度となり、第2ピークの山の位置に当る。したがってこの平均的渦に参加する粒子数は十数個となる。

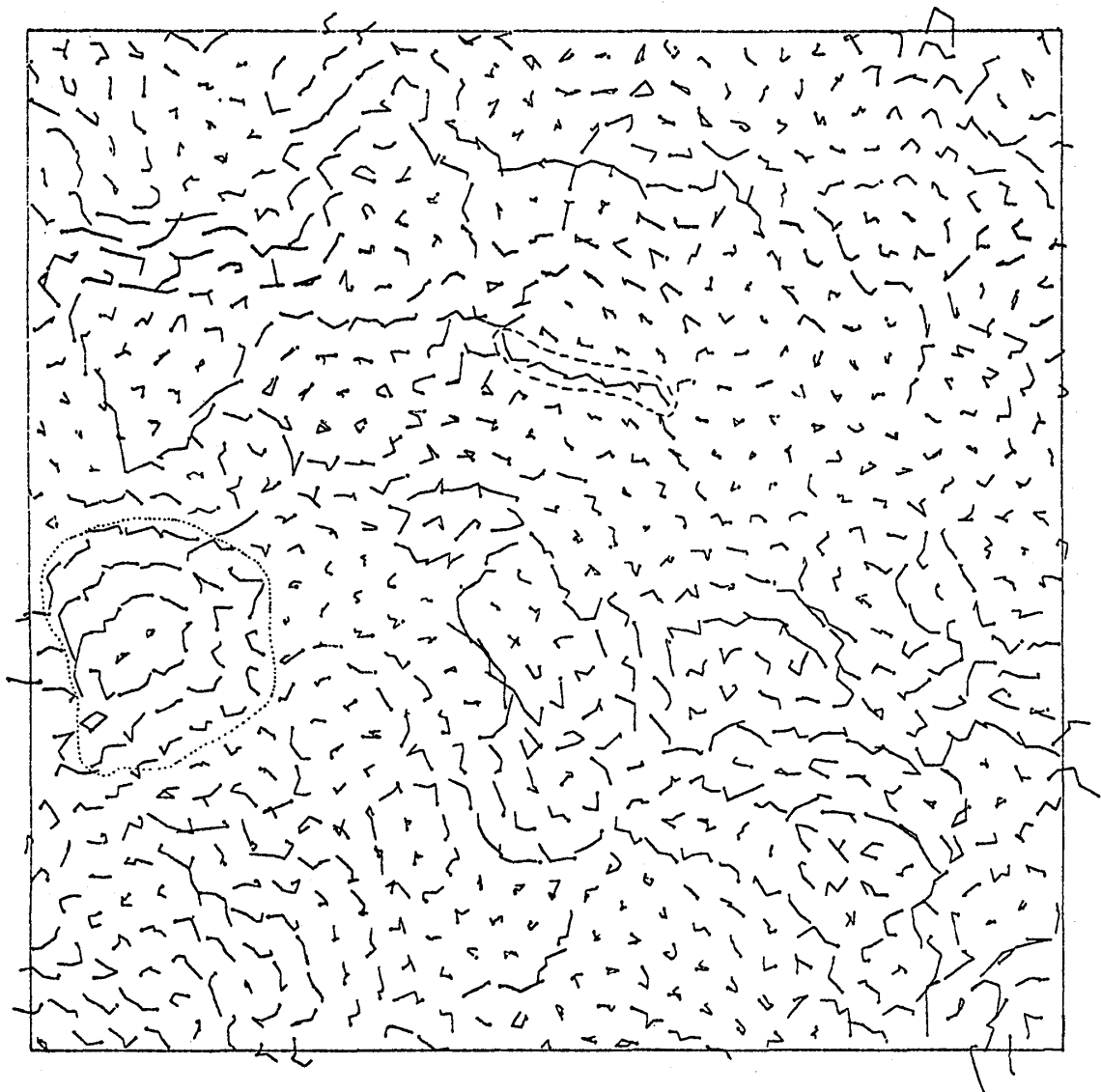


図 2b $\rho^* = 0.9239$, $N = 810$

STEP 2500 ~ 3000

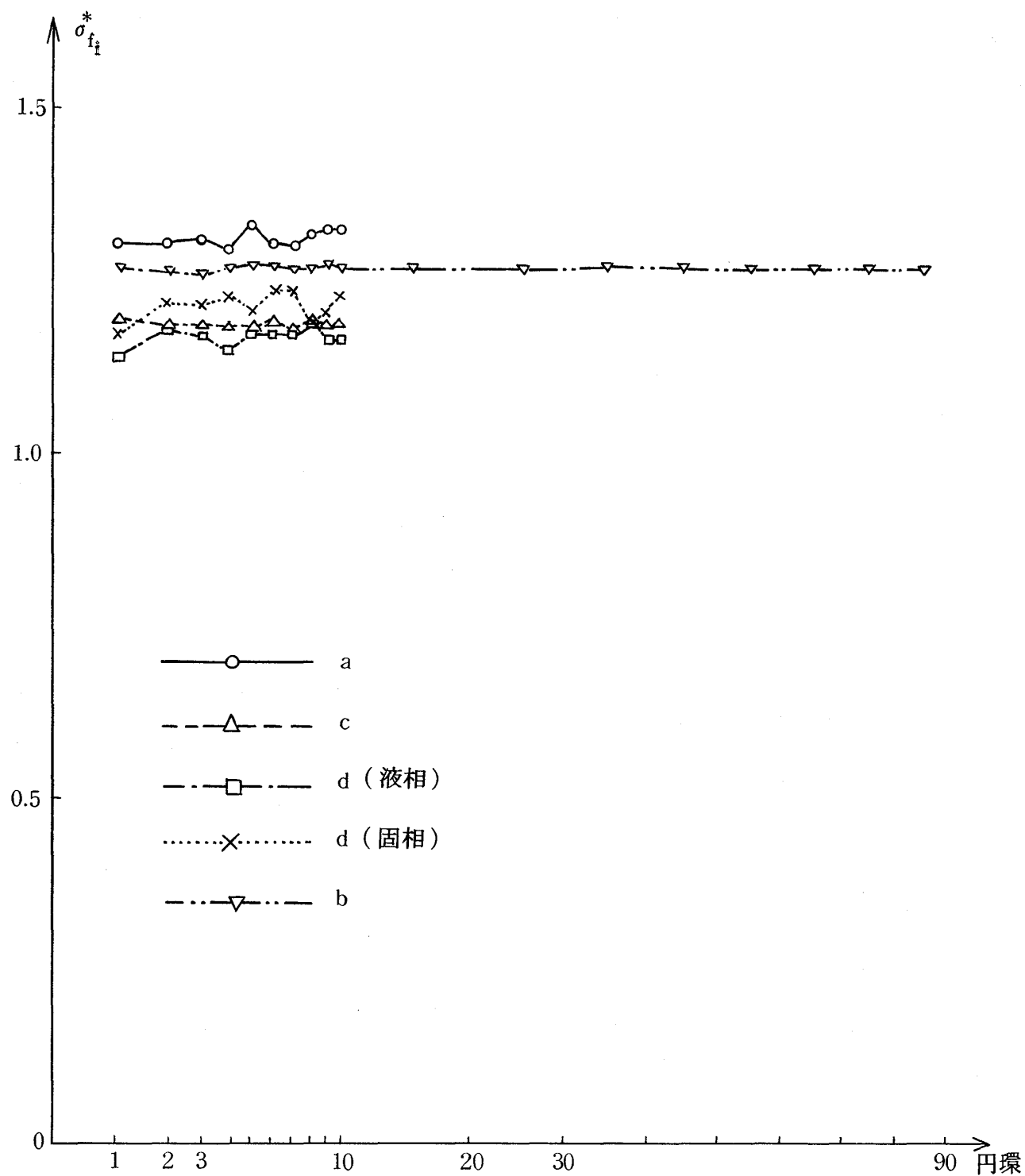


図3 $f_j(v_\theta^*)$ の標準偏差 a ~ d は表1に対応する。

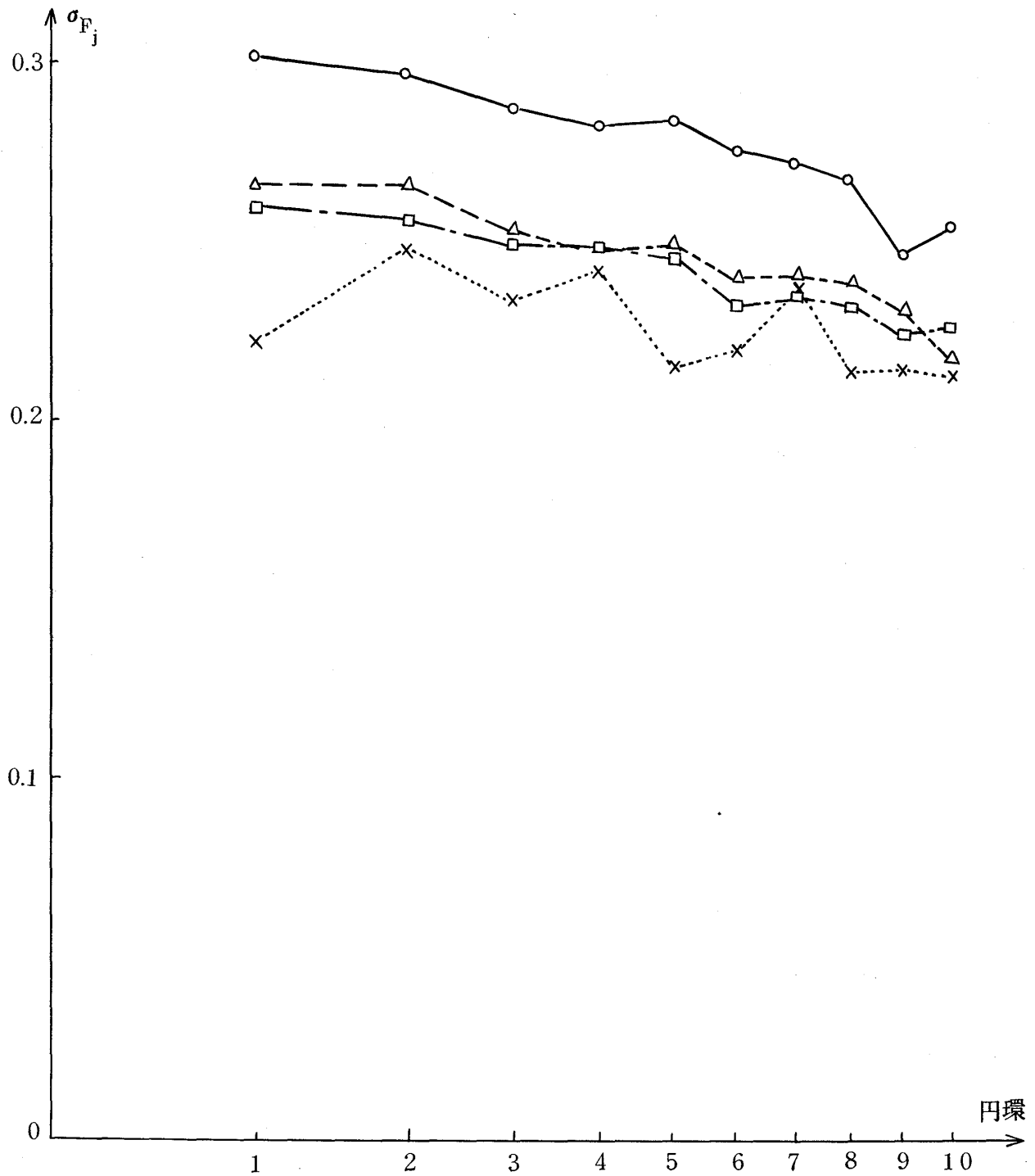


図4 $F_j(v_\theta^*)$ の標準偏差 記号は図3と同じ。

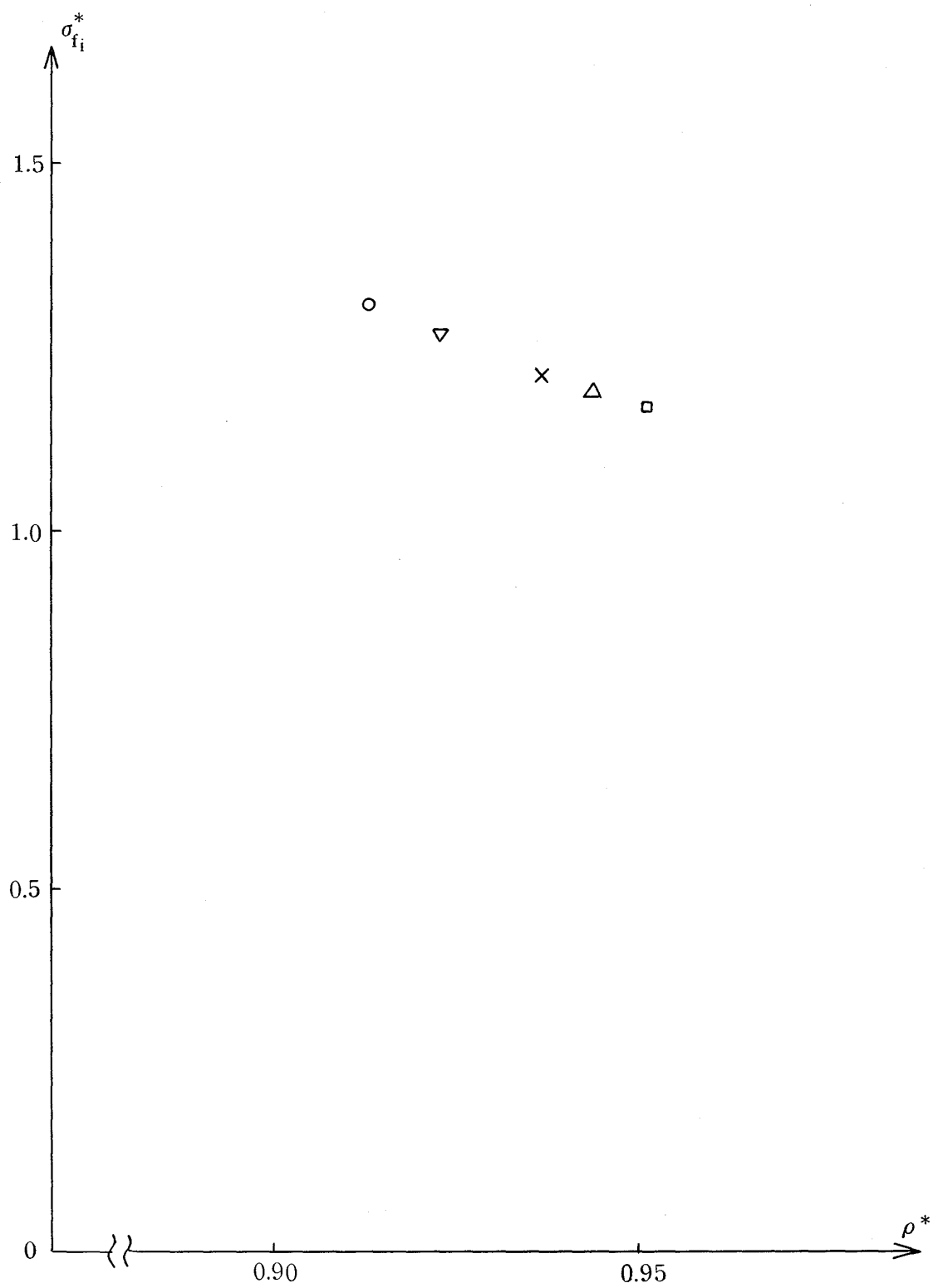


図5 各状態に対する $f_i(v_\theta^*)$ の標準偏差

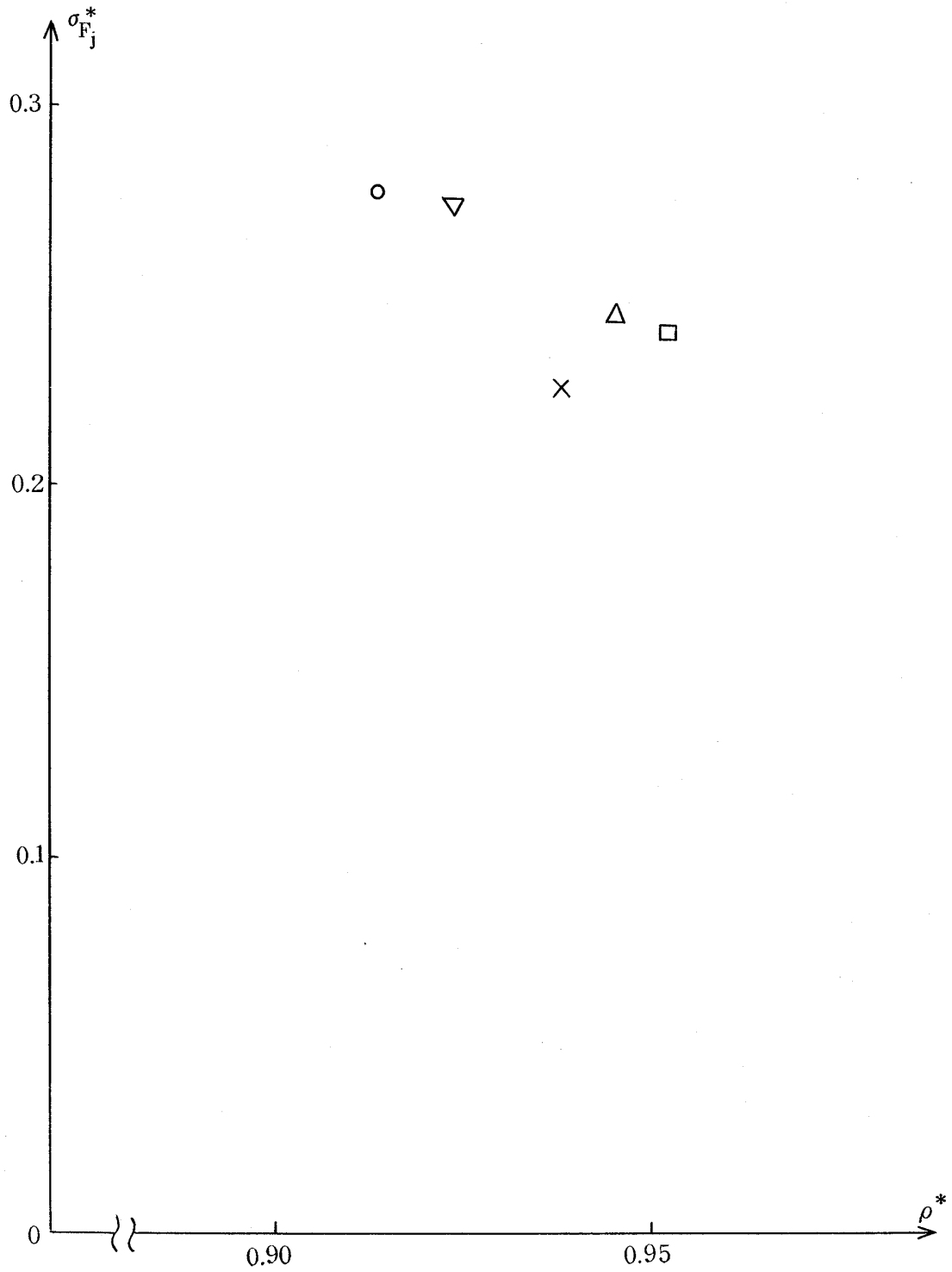


図 6 各状態に対する $F_j(v_\theta^*)$ の標準偏差

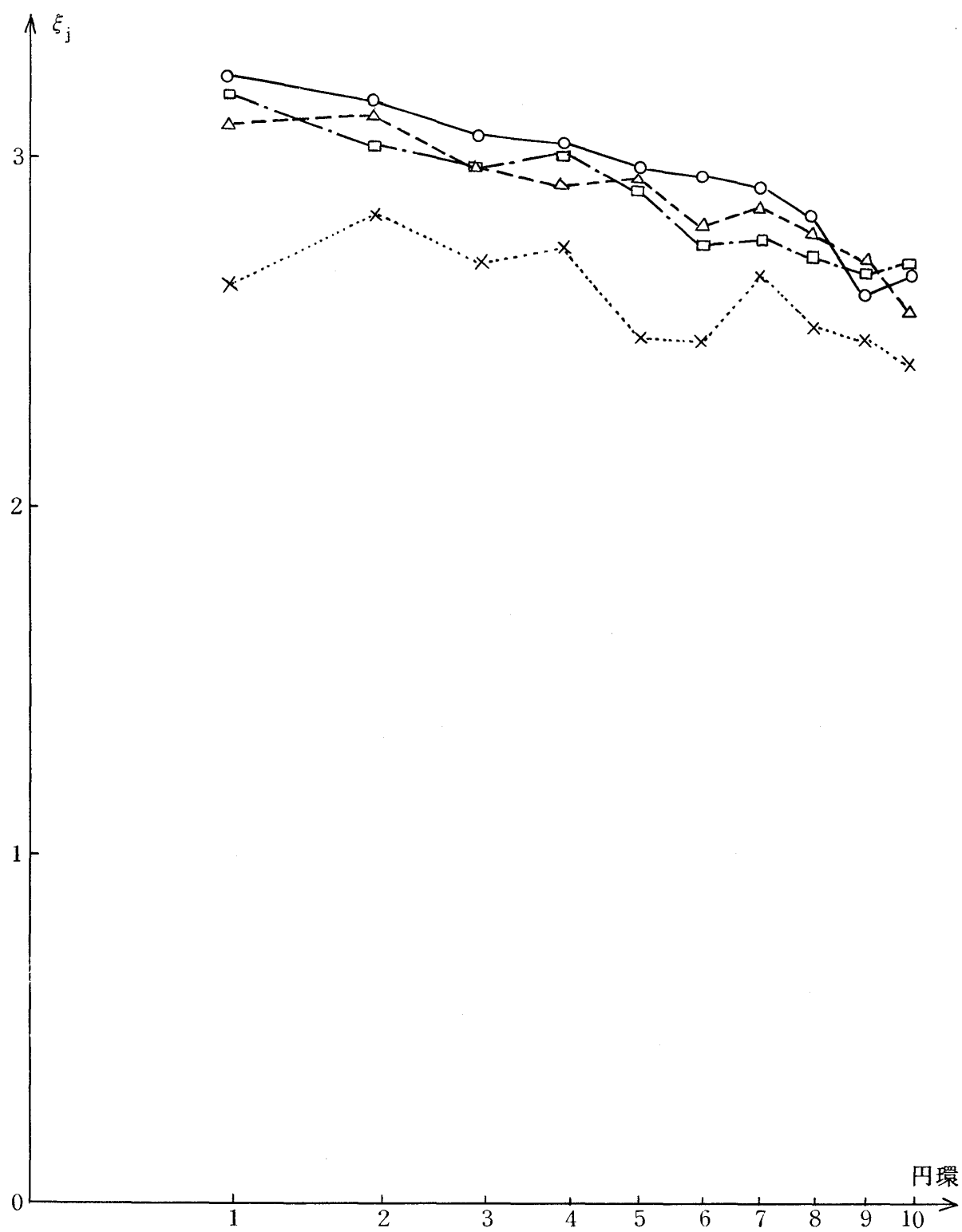


図7 リング状相関度

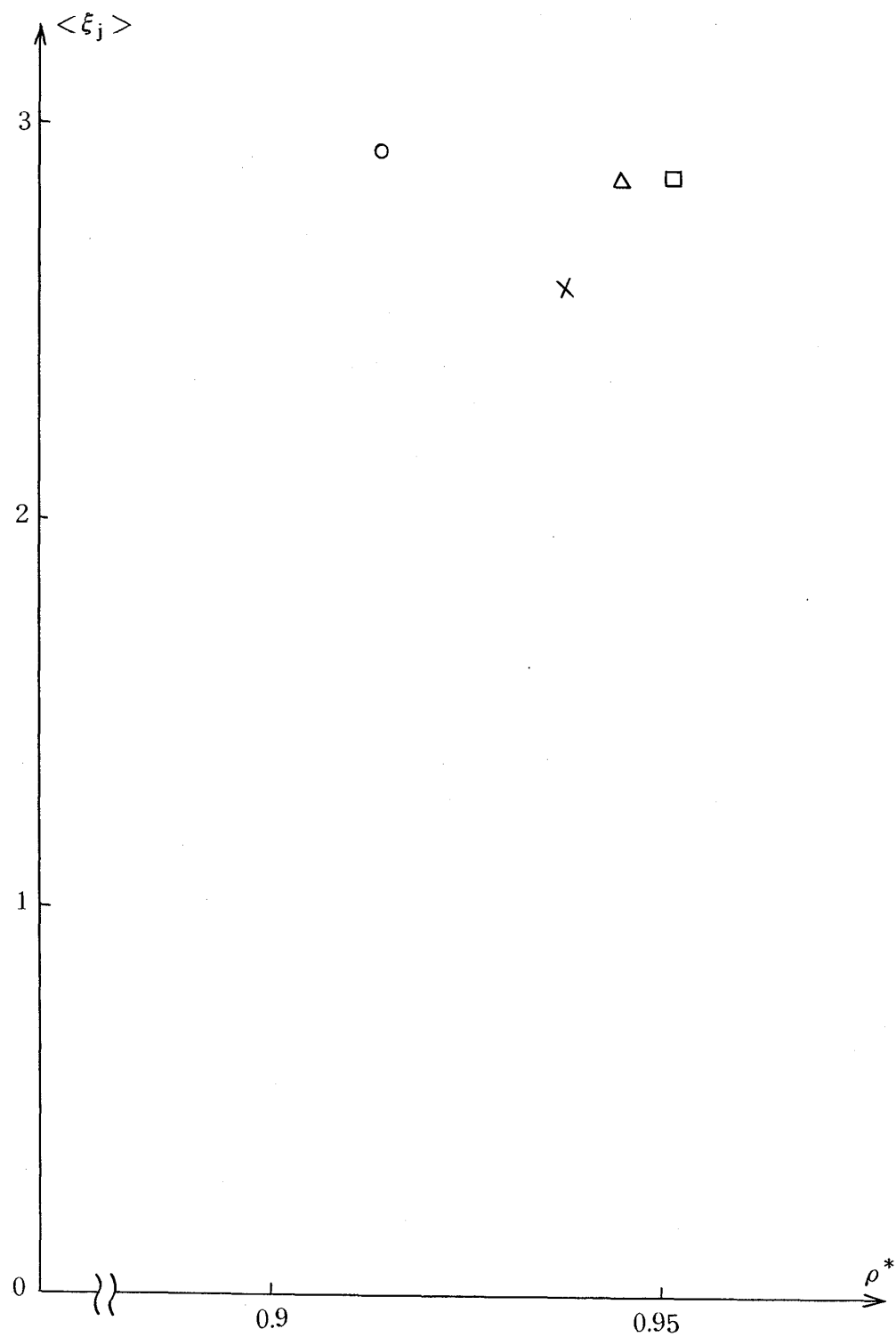


図8 各状態に対するリング状相関度

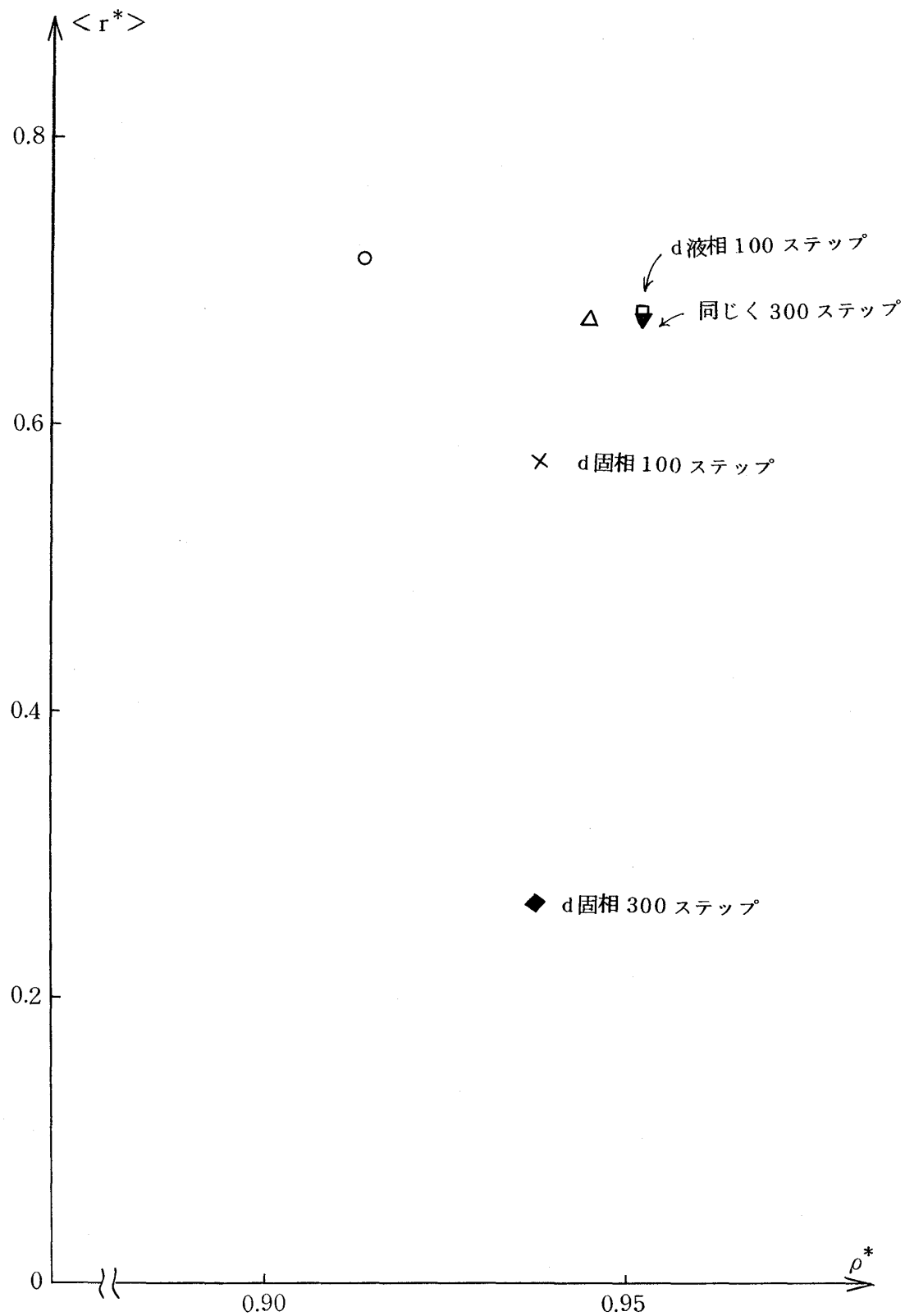


図9 各状態に対する平均の渦のサイズ